

# Studi Pemodelan Dinamika Proton Dalam Ikatan Hidrogen H<sub>2</sub>O Padatan Satu Dimensi

**Yossy Kurniawan dan Muhammad Nur**

Jurusan Fisika

Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Universitas Diponegoro, Semarang.

## Abstract

*The research of one dimension proton dynamic movement at inter hydrogen bond in H<sub>2</sub>O solid has been carried out. In this research proton movement equation that differential from Hamiltonian of movement particle clue too  $\Psi^4$  potensial between kisi. Equation Klein Gordon Non linear Discret (KGND) was found and finally the proton wave function has been determined, this study used numerical and analytical approach.*

*Numerical approach used finite difference method and computational by using Matlab 5.3.1 We found that the movement of protons was brown movement and the maximum probability for the position of proton on the middle of inter proton lattice.*

## Intisari

*Telah dilakukan penelitian dinamika gerak proton dalam ikatan antar hidrogen H<sub>2</sub>O padatan satu dimensi. Dalam penelitian ini dikaji persamaan gerak proton yang diturunkan dari Hamiltonian partikel yang bergerak karena potensial  $\Psi^4$  diantara lintasan kisi l. Persamaan yang didapat adalah persamaan diskret Klein-Gordon nonlinear (DNKG) sehingga akhirnya didapat fungsi gelombang proton. Pendekatan yang dilakukan adalah kajian melalui pendekatan analitik dan numerik. Pendekatan numerik menggunakan teori beda hingga dan program komputasi MATLAB 5.3.1. Hasil yang didapat adalah adanya gerak brown pada proton. Rapat kebolehtjadian menemukan proton yaitu di tengah lintasan kisi antar proton.*

## Pendahuluan

Dewasa ini, perkembangan riset tentang pemanfaatan reaksi inti sangat pesat, hal ini disebabkan oleh makin meningkatnya kebutuhan energi dan penggunaan radionuklida. Reaksi inti yang sedang dan akan terus dikembangkan adalah reaksi fusi (pembentukan) di berbagai akselerator di seluruh dunia, misalnya yang terus dilakukan di pusat akselerator Eropa dengan spesialisasi Proton Synchrotron (CERN) kerja sama Prancis dan Swiss [1].

Reaksi inti yang melibatkan atom dan penyusun-penyusunnya haruslah dikaji terus dan lebih lanjut sehingga didapat hasil reaksi yang diharapkan mampu memenuhi kesejahteraan umat manusia dengan resiko yang seminimal mungkin dan hasil yang semaksimal mungkin. Salah satu penyusun atom adalah proton. Kajian mengenai proton diharapkan menjawab karakteristik proton, dan salah satu karakteristiknya adalah dinamika proton dalam ikatan antar atom hidrogen. Ikatan hidrogen dapat membentuk fase baru dan menghasilkan suatu senyawa baru dalam ikatannya dengan atom lain seperti atom C, N, O, maupun ikatannya dengan atom hidrogen

sendiri, antara lain dalam pembentukan benzena, air(es), amoniak dan lain-lain [2]. Pada ikatan hidrogen tersebut terdapat karakteristik proton penyusun atomnya, yaitu gerakan-gerakan dinamis proton dalam ikatan tersebut dapat dipelajari dengan mengkaji persamaan gerak proton dalam ikatan sehingga dapat diketahui perilaku proton dalam keadaan tertentu. Ikatan hidrogen dalam molekul H<sub>2</sub>O merupakan ikatan kovalen, kajian kepadanya diperlukan untuk mengetahui bagaimana keadaan ideal dari molekul tersebut. Molekul H<sub>2</sub>O yang lebih dikenal sebagai air, sangat besar dan mendasar manfaatnya dalam kehidupan ini. Kajian mendalam tentangnya baik secara atomik dan molekuler diperlukan untuk menjawab karakteristik molekul H<sub>2</sub>O.

Kajian mengenai partikel penyusun inti atomik dan molekuler dalam hal ini proton sebagai salah satu penyusun inti baik itu karakteristik atomik maupun molekulernya sangat diperlukan. Salah satu karakteristik proton adalah dinamika geraknya. Visualisasi gerak dalam molekul dan peluang mendapatkan partikel tersebut dalam lintasan antar proton dapat membantu analisis

karakteristiknya. Pada akhirnya jika molekul  $H_2O$  tidak mempunyai karakteristik seperti hasil yang didapat maka molekul  $H_2O$  tidaklah ideal.

Disamping hal tersebut diatas untuk energi masa depan sangat diharapkan berasal dari energi fusi, lebih spesifik lagi adalah reaksi *termonuklir*, yaitu reaksi fusi dari inti ringan menjadi inti berat dengan bahan dasar [2]. Bahan dasar dari reaksi tersebut adalah deuterium dan tritium yang keduanya dapat diekstrak dari molekul  $H_2O$ . Yaitu terdapat deuterium 0,015% dari molekul  $H_2O$  sedang tritium didapat dari penembakan dua isotop yang terdapat dalam litium alamiah dengan neutron. Suatu kajian mikroskopik tentang molekul penghasil deuterium yang ekonomis dalam hal ini  $H_2O$  sangat diperlukan [3].

Di dalam alam, ada sejumlah besar daerah dengan keadaan geografis yang tertutup oleh es, yang merupakan  $H_2O$  padatan. Dua kutub yang sepanjang tahun tertutup es, sangat diharapkan pemanfaatannya. Keadaan  $H_2O$  yang memadat merupakan materi terkondensasi, yaitu suatu materi dengan keadaan *stochastic resonance*. Dalam suatu keadaan kondensasi, panjang gelombang de Broglie atom-atom sebanding dengan rata-rata jarak atom. Keadaan tersebut menyebabkan atom-atom memadat ke dalam keadaan kuantum yang sama. Semua atom digambarkan oleh fungsi gelombang yang sama, yang memberikan banyak sifat tidak umum pada kondensasi tersebut [4]. Keadaan ini juga yang menyebabkan struktur  $H_2O$  padatan memiliki besaran-besaran fisis yang tidak umum [5].

Penyediaan energi alternatif masa depan harus benar-benar memadai sesuai kebutuhan. Yang sangat mungkin dikembangkan adalah penyediaan energi melalui reaksi fusi dengan bahan dasar deuterium yang dapat dihasilkan dengan mengekstrak molekul  $H_2O$ . Permasalahan yang muncul adalah tinjauan dinamika gerak partikel merupakan tinjauan mikroskopik dan melibatkan partikel penyusun inti salah satunya adalah proton.

Kajian mendalam tentang karakteristik proton sangat diperlukan dalam hal ini kajian dinamika gerak sebagai fungsi gelombangnya sehingga didapat karakteristik gerak dan peluang menemukannya dalam lintasan kisi

atom oksigen yang dikaji secara analitik dan numerik.

Tujuan penelitian ini adalah mempelajari keadaan tertentu dari proton dengan menggunakan persamaan gerak proton dalam atom hidrogen yang berikatan (dalam hal ini atom hidrogen yang berikatan membentuk  $H_2O$ ) sehingga dapat diketahui karakteristik proton secara analitik dan dapat disimulasikan secara komputasi numerik satu dimensi.

Penelitian ini dibatasi pada dinamika gerak proton atom hidrogen dalam molekul  $H_2O$  padatan yang bergerak karena pengaruh potensial sumur ganda. Pergerakan proton taat pada persamaan *Klein-Gordon* diskret nonlinear yang dibahas secara analitik dengan studi pustaka dan analisis numerik satu dimensi dengan pembuatan program komputasi.

### Dasar teori

Teori mekanika-kuantum untuk atom yang dikembangkan dalam waktu singkat telah memberikan sumbangan yang cukup besar dalam memahami permasalahan mengenai alam semesta juga yang menyangkut gejala atomik. Teori ini telah menjawab berbagai hal tentang atom dan materi penyusunnya ataupun fenomena-fenomena di dalamnya seperti atom berinteraksi untuk membentuk molekul stabil, asal mula tabel periodik unsur-unsur dan sebab zat padat memiliki sifat karakteristik listrik, magnetik, optis dan mekanis [6].

Sebuah atom hidrogen terdiri dari sebuah proton, partikel yang bermuatan listrik  $+e$ , dan sebuah elektron, partikel yang bermuatan  $-e$  yang bermassa 1.835 kali lebih ringan dari proton. Elektron tersebut bergerak disekeliling proton dan cenderung melepaskan diri dari inti tapi dicegah oleh medan listrik proton [3]. Seperti dalam teori Bohr, koreksi gerak proton dapat dilakukan dengan mengganti massa elektron dengan massa tereduksinya  $m'$  yang akan dibahas lebih lanjut dalam bab ini.

Muatan positif atom terkungkung dalam suatu daerah sangat kecil di inti atom. Inti atom memiliki muatan  $+Ze$ , dengan  $Z$  adalah nomor atom. Seluruh massa atom (99,9 %) berasal dari inti atom. Massa berbagai atom hampir mendekati kelipatan bulat massa hidrogen [7]. Oleh karena itu, dianggap bahwa inti atom hidrogen tersusun dari suatu satuan

muatan positif mendasar, satuan mendasar ini disebut *proton* (3). Massa proton sama dengan massa atom hidrogen tanpa massa elektron dan energi ikat, dan bermuatan  $+e$ .

Sebelum neutron ditemukan, kesulitan dalam menjelaskan karakteristik inti dapat diatasi dengan adanya *model proton-elektron*, yang mempostulatkan bahwa inti atom juga mengandung  $(A-Z)$  buah elektron. Berdasarkan anggapan ini massa inti atom akan sekitar  $A$  kali massa proton (karena massa elektron dapat diabaikan) dan muatan inti atom akan sama dengan  $A(+e) + (A-Z)(-e) = Ze$ . merupakan

Peluruhan proton dapat mungkin terjadi dengan asumsi adanya partikel *quark* yang meluruh menjadi *lepton* melalui emisi dari suatu partikel.

Berikut adalah beberapa partikel-partikel elementer, yaitu partikel-partikel dasar yang tidak terdapat lagi struktur internalnya. Beberapa partikel elementer adalah *lepton*, *hadron* dan *quark*. Proton merupakan salah satu bagian partikel elementer yang termasuk *barion*.

1. *Lepton*, merupakan partikel elementer secara ilmiah dengan tak terdapat petunjuk adanya struktur internal. Elektron dan neutron merupakan bagian dari kelompok lepton.
2. *Hadron*, adalah partikel elementer, tidak seperti lepton, hadron mengalami interaksi kuat dan interaksi lemah. Hadron juga berbeda dari lepton karena hadron menempati ruang dan berukuran inti. Berukuran diameter sedikit lebih besar dari  $1 \text{ fm}$  ( $10^{-15} \text{ m}$ ). Hadron dapat berupa meson yang merupakan partikel spin 0 yang massa diamnya terletak antara *muon* dan proton, atau *barion* yaitu partikel spin  $\frac{1}{2}$  atau  $\frac{3}{2}$  yang massanya sama atau lebih besar dari proton.
3. *Quark*, dibayangkan sebagai elementer seperti juga lepton, pada hakekatnya merupakan partikel-titik yang tidak memiliki struktur internal, tetapi berlainan dengan lepton- bahkan berlainan dengan partikel lain di alam, diduga quark memiliki muatan listrik pecahan [8].

sebuah partikel dengan massa kurang lebih sama dengan massa proton (sebenarnya 0,1% lebih berat), tetapi tidak mempunyai muatan. Menurut *model Proton-neutron*, sebuah inti atom terdiri atas  $Z$  proton dan  $(A-Z)$  neutron yang memberikan muatan total  $Ze$  dan massa total sekitar  $A$ . Karena massa neutron dan proton hampir sama, keduanya dikelompokkan ke dalam *nukleon*. Tabel 2.1

Ditemukannya *neutron* pada tahun 1932 menjawab seluruh permasalahan nukleon. Neutron merupakan tabel karakteristik nukleon

Berbagai macam ikatan dalam partikel antara lain adalah ikatan ionik dan ikatan kovalen. Ikatan ionik adalah pemberian ion atau atom bermuatan, dalam hal ini adalah elektron valensi kepada atom lain sehingga keduanya dalam keadaan stabil, seperti ikatan pada NaCl, misalnya sebuah atom natrium sentral ( $1s^2 2s^2 2p^6 3s$ ). Satu elektron  $3s$  berada di luar kulit penuh  $2p$ , dan sebuah atom klor netral ( $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ ) yang kekurangan satu elektron untuk mengisi penuh kulit  $3p$ . Untuk melepaskan elektron terluar dari atom natrium diperlukan energi sebesar 5,14 eV, yakni *energi ionisasi* atom Na. Dengan hasil terbentuk ion positif  $\text{Na}^+$ . Jika elektron valensi dikaitkan dalam atom Cl, maka didapat ion negatif  $\text{Cl}^-$  dengan pelepasan energi sebesar 3,61 eV, yakni *afinitas elektron* dari atom Cl [8]. Ikatan yang kedua adalah ikatan kovalen, yaitu pemakaian bersama elektron valensi untuk membentuk senyawa stabil atom, misalnya ikatan pada  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_3$ , LiNa, KNa, NaRb dan lain-lain.

Menurut [8], ikatan hidrogen umumnya ada antara atom hidrogen asam yang mempunyai sebagian kecil muatan positif (misalnya N-H, O-H, F-H), dan atom elektronegatif yang mempunyai konsentrasi muatan negatif tinggi (misalnya atom nitrogen dalam amina, atom oksigen dalam alkohol dan air). Ikatan hidrogen tidak disebabkan oleh momen dipol molekul, tetapi oleh adanya andil proton antara dua atom elektronegatif seperti F, O atau N yang berada pada jarak terpisah dan dapat diterangkan dengan baik dengan adanya tarik-menarik elektron yang terlokalisasi [8]. Harga energi minimum dari ikatan hidrogen sepasang molekul diatomik adalah  $6 \text{ kkal mol}^{-1}$  atau  $400 \times 10^{-22} \text{ Joule/pasangan molekul}$ .

Tabel 2.1 muatan, massa dan spin nukleon

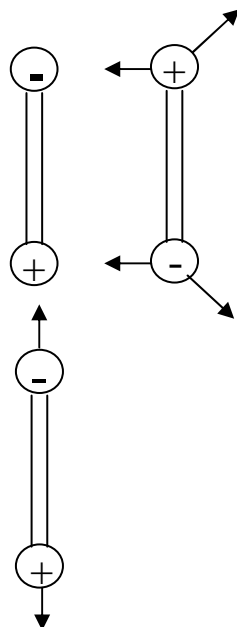
Nama	muatan	massa energi	spin
Proton	+e	938,28 MeV	$\frac{1}{2}$
Neutron	0	939,57 MeV	$\frac{1}{2}$

Molekul air adalah salah satu contoh kasus bekerjanya gaya dipol dalam molekul yang melibatkan andil proton. Bekerjanya gaya elektrik dipol pada molekul diperlihatkan oleh gambar 2.1.

Atom oksigen dalam air cenderung menarik semua elektron molekul sehingga tampak seperti ujung negatif dari dipol; kedua proton “murni” membentuk ujung positif dipol, dan masing-masingnya dapat menarik oksigen negatif dari molekul air di dekatnya [3]. Jenis ikatan inilah yang menyebabkan struktur kristal es berciri khas heksagonal, dan apabila ikatan ini melibatkan atom hidrogen seperti pada air maka ikatan ini disebut ikatan hidrogen. Molekul  $H_2O$ , atom oksigen memiliki delapan elektron, empat diantaranya menempati kulit 2p. Pengisian semua elektron ini pada orbital atomik 2p dimulai dengan satu

elektron pada orbital  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$ . Elektron pada 2p yang keempat harus berpasangan dengan salah satu dari ketiga elektron yang semula, misalnya ia menempati orbital  $p_x$ , dengan demikian atom oksigen mempunyai dua elektron 2p yang tidak berpasangan, dan masing-masingnya dapat membentuk ikatan dengan elektron 1s dari atom H untuk membentuk sebuah molekul  $H_2O$ . Atom oksigen dalam ikatan ini sebagai pembentuk dipol sehingga molekul  $H_2O$  memiliki ikatan terarah. Ikatan molekul tersebut mempunyai arah tetap yang besarnya tertentu, sudut yang terbentuk karena adanya tolakan coulomb dari kedua atom H [9].

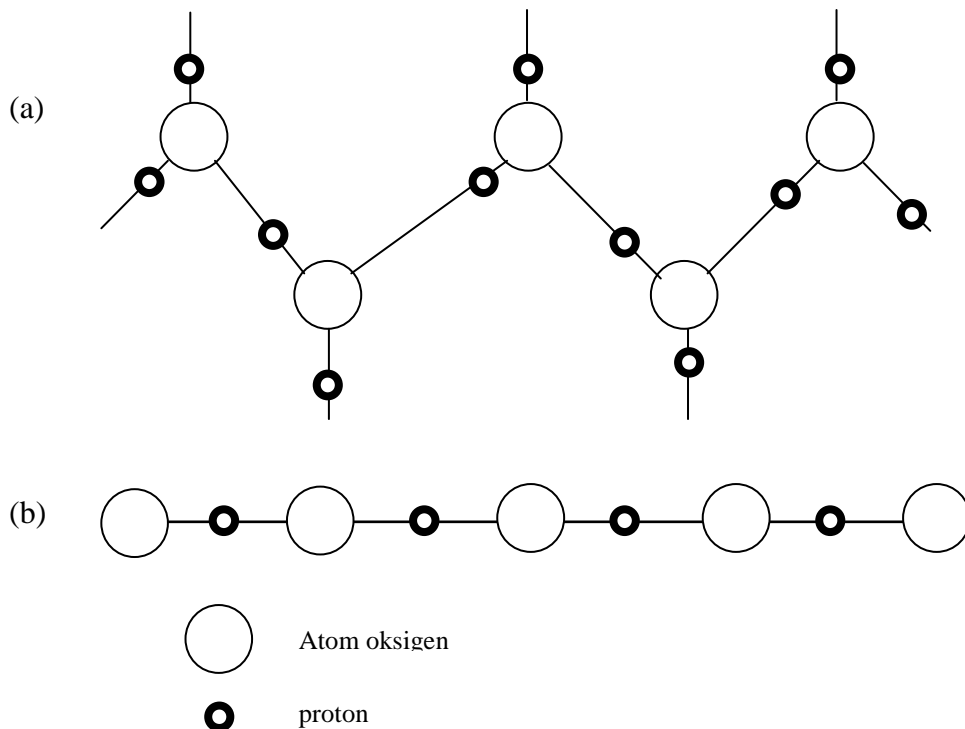
Gambar 2.2 berikut merupakan gambar struktur  $H_2O$  dalam tinjauan dua dimensi dan satu dimensi.



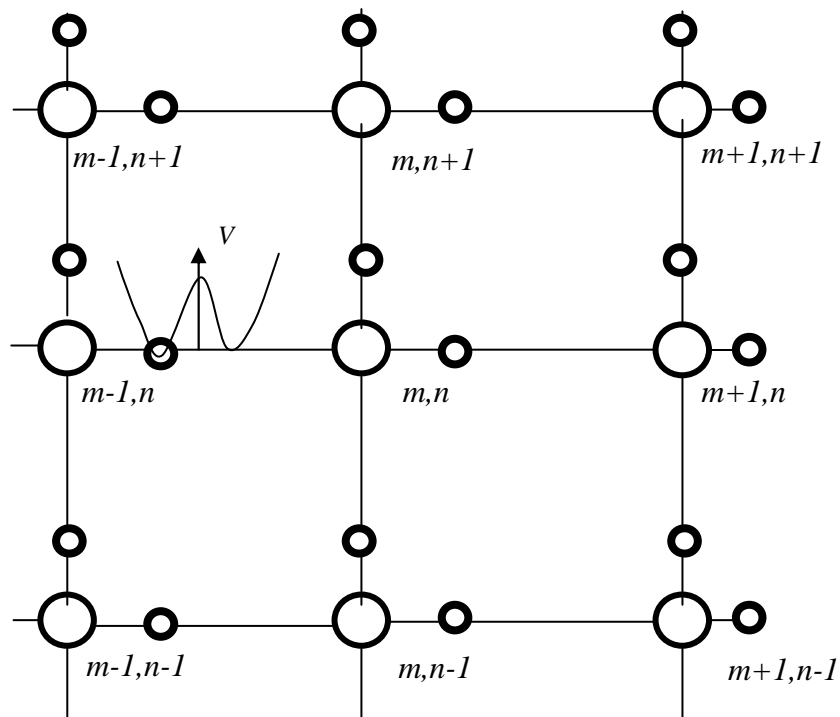
Gambar 2.1 Gaya tarik dan tolak pada molekul

Pergerakan proton dalam ikatan antar atom hidrogen dipengaruhi oleh potensial sumur ganda yang bekerja pada

proton. Potensial  $V$  membuat proton bergerak diantara kisi tertentu  $l$ .



Gambar 2.2 (a) Struktur molekul  $H_2O$  dalam model dua dimensi  
 (b) Struktur molekul  $H_2O$  dalam model satu dimensi [20]



Gambar 2.3 Skema molekul air dan potensial yang bekerja pada proton [23]

Gambar 2.3 merupakan permukaan dua dimensi  $H_2O$  yang menggambarkan keadaan standar  $x_{mn}$ , perpindahan proton dari titik tengah dalam ikatan horizontal antara kisi  $(m-l, n)$  dan  $(m, n)$  dan dalam ikatan vertikal adalah antara kisi  $(m, n-1)$  sampai  $(m, n)$ . Pergerakan yang terjadi adalah pergerakan

Dinamika proton dalam  $H_2O$  padatan dipelajari berdasarkan model kisi satu dimensi. Satu sistem yang menarik adalah ikatan antar hidrogen dalam  $H_2O$  padatan. Proton mempunyai potensial yang bekerja dalam sumur potensial ganda (gambar 2.4) di antara kisi. Proton terperangkap dalam kisi dan bergerak periodik karena potensial  $\psi^4$  tersebut.

Potensial  $\psi^4$  yang bekerja pada proton menghasilkan pergerakan tertentu dalam lintasan kisi. Mekanisme ini terjadi sebagai peristiwa *stochastic resonance* sehingga kasusnya adalah nonlinear.

Persamaan Schrödinger tidak dapat menjelaskan kasus dalam batas relativistik karena koordinat ruang dan waktu harus simetris [11].

Dalam teori relativitas, hubungan energi  $E$  dan momentum  $p$  adalah:

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (2.1)$$

dengan  $c$  adalah kecepatan cahaya. Asumsi dasar ini yang membawa pada persamaan Klein-Gordon [11].

Dari asumsi persamaan (2.1) tersebut dan dengan mengambil operator:

$$E \rightarrow \bar{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (2.2)$$

$$p \rightarrow \bar{p} = -i\hbar \nabla \quad (2.3)$$

serempak, maksudnya semua proton bergerak bersama-sama karena potensial " $\psi^4$ " [10].

Dari gambar 2.3, jika diambil satu proton yang bergerak dengan potensial  $V = (1 - \psi^2)^2$  [10] adalah sebagai berikut:

maka persamaan Klein-Gordon secara umum dapat dituliskan [19]:

$$\nabla^2 \psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi \quad (2.4)$$

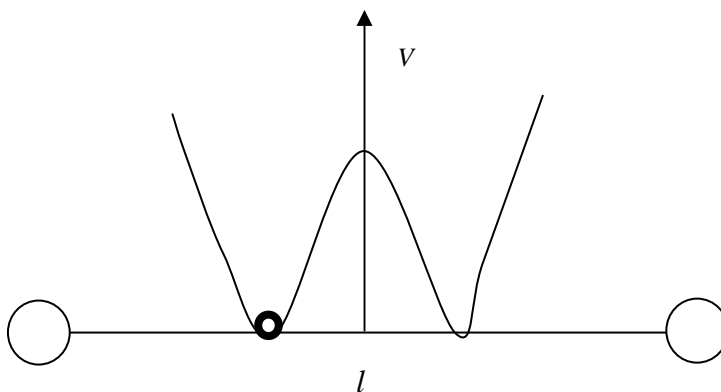
Persamaan Klein-Gordon merupakan persamaan yang menggambarkan keadaan suatu partikel yang bergerak periodik dalam keadaan tertentu [12].

Persamaan Klein-Gordon nonlinear diturunkan dari persamaan Hamiltonian partikelnya. Persamaannya adalah sebagai berikut:

$$\partial_t^2 \psi - c_0^2 \partial_x^2 \psi + \omega_0^2 V(\psi) = 0 \quad (2.5)$$

yang menggambarkan gerak gelombang dari partikel yang dipengaruhi oleh potensial sumur ganda. Potensial yang bekerja pada proton dalam keadaan *stochastic resonance* adalah model potensial  $\psi^4$  [13].

Persamaan Klein-Gordon dapat berbeda-beda satu sama lain, tergantung keadaan yang berlangsung. Salah satu bentuk yang lain adalah persamaan Klein-Gordon tak gayut waktu [13]:



Gambar 2.4 Skema proton dalam kisi

$$\left[ 2(E_0 - E(x)) + \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \psi = 0 \quad (2.6)$$

dengan  $E_0$  adalah energi partikel pada titik acuan awal,  $E(x)$  adalah energi tertentu bergantung jarak,  $m$  adalah massa partikel,  $\hbar$  adalah konstanta Planck =  $6,626 \times 10^{-34}$  J.s,  $\hbar = h/2\pi$  dan  $\psi$  adalah fungsi gelombang partikel.

Metode beda hingga adalah metode yang menggantikan turunan dengan hasil bagi diferensial sehingga diperoleh sistem persamaan linear dengan variabel yang diketahui dari variabel tak bebas persamaan diferensial tersebut [14]. Beda hingga digunakan untuk menyajikan kekontinuan dari ruang dan waktu menjadi sekelompok titik-titik diskret yang berjarak tertentu.

Syarat perhitungan yang dapat diterima adalah harus mempunyai kestabilan tertentu yang tidak menyebabkan bertambahnya ralat setiap perhitungan diteruskan. Stabilitas numerik adalah suatu nilai kesalahan yang konstan pada perhitungan numerik dan tidak mengakibatkan kenaikan kesalahan saat perhitungan komputasi dilanjutkan [12]. Berikut merupakan pendekatan beda hingga dengan metode beda terpusat:

$$\left( \frac{\partial f}{\partial x} \right)_l \cong \frac{f_{l+1} - f_l}{(\Delta x)} \quad (2.7)$$

Sedangkan untuk persamaan turunan kedua, pendekatan beda hingga yang digunakan adalah:

$$\left( \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right) = \frac{f_{l+1} - 2f_l + f_{l-1}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2 \quad (2.8)$$

### Metode penelitian

Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah dengan menggunakan studi pustaka untuk mendapatkan landasan teori tentang dinamika proton dalam ikatan hidrogen kemudian digunakan pendekatan numerik untuk penyelesaiannya dan visualisasi persamaan gerak proton dengan program komputasi.

Penelitian ini diawali dengan penggunaan persamaan Hamiltonian partikel

(Lampiran A), kemudian dikenakan potensial proton  $\psi^4$  pada persamaan tersebut. Persamaan diskret Klein-Gordon yang diselesaikan menghasilkan fungsi gelombang proton. Persamaan tersebut diselesaikan dengan menggunakan pendekatan analitik dan numerik melalui teori beda hingga.

Visualisasi persamaan gerak dengan menggunakan program komputasi MATLAB 5.3.1 untuk melihat pergerakan proton dan akhirnya didapat peluang mendapatkan proton sepanjang jarak kisi antar proton pada atom hidrogen.

### Hasil dan pembahasan

Di bawah ini akan dibahas persamaan gerak proton dalam ikatan hidrogen dalam air yang akan diselesaikan secara analitik dan numerik. Persamaan gerak proton yang bergerak dengan pengaruh potensial Morse adalah [23]:

$$\partial_t^2 \psi - c_0^2 \partial_x^2 \psi + \omega_0^2 V(\psi) = 0 \quad (4.1)$$

Penyelesaian persamaan (4.1) tersebut adalah:

$$\psi = \left( 1 - \left( \frac{1}{\omega_0^2} \sin \frac{\pi x}{l} \sin \frac{c_0 \pi t}{l} \right)^{1/2} \right)^{1/2} \quad (4.2)$$

dengan  $\psi$  adalah fungsi gelombang proton,  $x$  adalah kelipatan lintasan proton,  $l$  adalah jarak kisi atau lintasan antar proton,  $c_0$  adalah kecepatan karakteristik proton dan  $t$  adalah waktu karena fungsi tersebut adalah gayut waktu.

Kajian ini akan menampilkan visualisasi dari dinamika gerak proton dalam ikatan molekul  $H_2$  dengan pendekatan numerik satu dimensi melalui pendekatan beda hingga. Untuk persamaan gerak proton (4.1), pendekatan numerik yang dilakukan adalah:

$$(\psi_{x,t})_{num} = (2\psi_{x,t} - \psi_{x+h,t} - \psi_{x-h,t}) - \frac{\omega_0^2}{16} t^2 + \frac{\omega_0^2}{128} \left( \frac{l}{c_0} \right)^2 \sin \frac{\pi x}{l} \psi_{x,t} \quad (4.3)$$

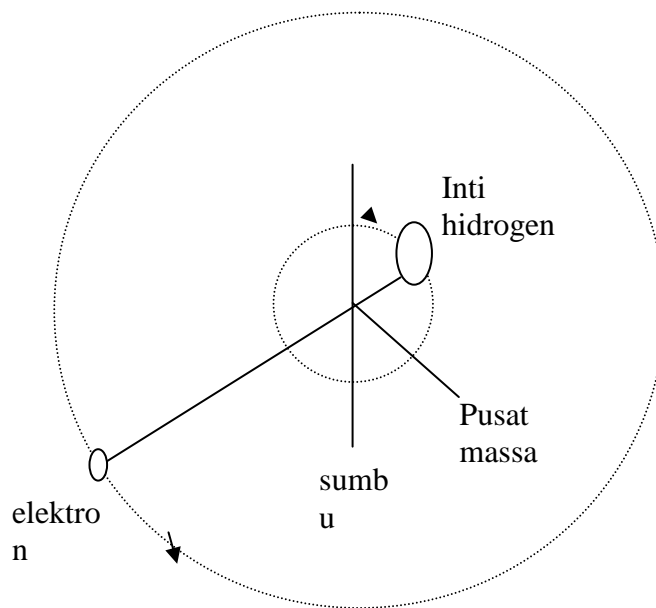
dengan  $(\psi_{x,t})_{num}$  adalah fungsi gelombang dengan pendekatan numerik,  $\psi_{x,t}$  adalah fungsi gelombang proton bebas dan  $h$  merupakan lebar langkah perhitungan numerik.

Gerak suatu partikel ditentukan oleh persamaan geraknya. Dalam bab ini dibahas perilaku proton sebagai partikel bermuatan yang berikatan dan mempunyai interaksi gaya dengan inti dan juga ikatannya dengan atom lain membentuk molekul  $H_2O$ . Molekul  $H_2O$ , terdapat dua atom hidrogen dan sebuah atom oksida yang berperan membentuk arah dipol dalam ikatannya tersebut. Dalam hal ini akan dibahas ikatan molekul  $H_2$  yang dapat mewakili molekul-molekul yang stabil lainnya.

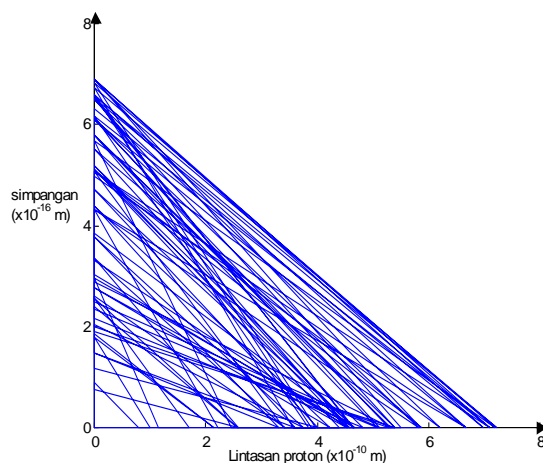
Untuk menyederhanakan analisis, pada fisika modern biasanya inti hidrogen (proton)

dianggap diam ketika elektron berputar mengelilinginya. Tentu saja keduanya, inti dan elektron, berputar di sekeliling pusat massanya yang terletak sangat dekat inti karena massa inti jauh lebih besar daripada elektron (gambar 4.1 ).

Sistem seperti ini ekuivalen dengan partikel tunggal bermassa  $m'$  yang berputar di sekitar partikel yang lebih berat.  $m'$  merupakan massa tereduksi elektron yang merupakan faktor pengabai gerak inti (proton).



Gambar 4.1 Elektron dan proton berputar pada pusat massa sistem [3]



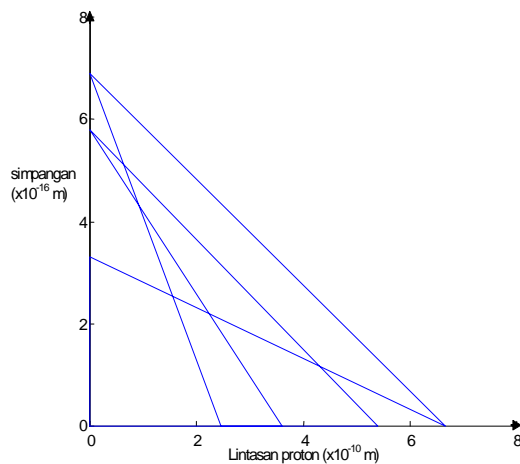
Gambar 4.2 Simulasi dinamika gerak proton



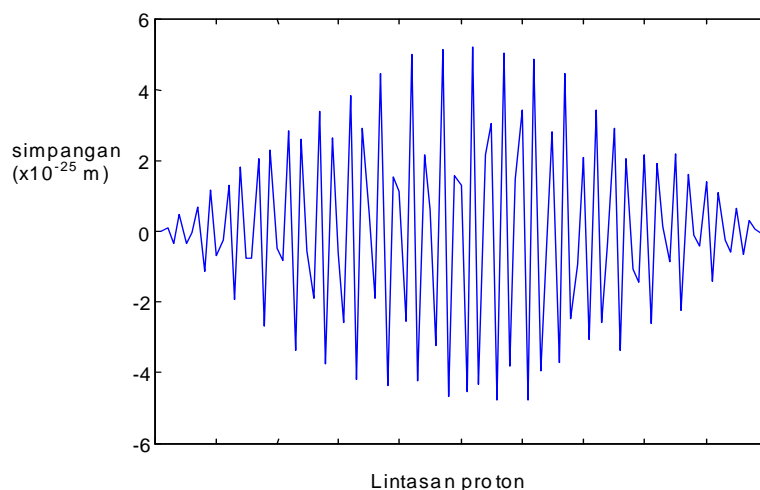
Dalam mekanika kuantum, kuantitas yang diperlukan untuk menggambarkan keadaan suatu partikel adalah fungsi gelombang  $\psi$  dari benda itu. Walaupun  $\psi$  sendiri tidak mempunyai arti fisis tertentu, namun  $\psi$  merupakan langkah awal untuk menentukan besaran- besaran fisis lain untuk partikel tersebut misalnya momentum, momentum sudut, dan energi dari partikel. Fungsi gelombang  $\psi$  juga dapat dianalisis pada gambar yang didapat. Gambar 4.2 menunjukkan pergerakan proton sepanjang lintasan  $l$ . Pada gambar 4.2 tersebut tampak bahwa setiap perubahan lintasan menghasilkan perubahan simpangan yang acak, yang

membuktikan adanya gerak Brownian dalam partikel mikroskopik tersebut. Adanya gerak brown juga semakin diperjelas dengan menyederhanakan gambar 4.2 dengan mengurangi titik-titik pada gambar 4.3. Pada gambar 4.3 tersebut dapat dijelaskan adanya tumbukan partikel pada posisi tertentu yang menunjukkan dalam molekul tersebut terdapat tumbukan tak putus-putus (gerak brown) sepanjang lintasan gerakanya.

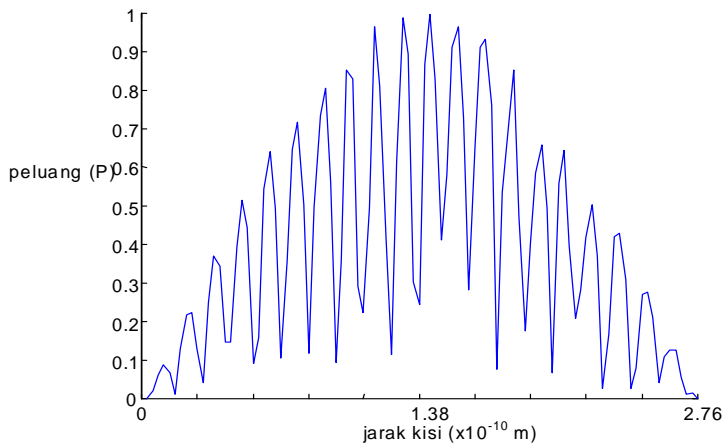
Dari gambar 4.3. tersebut juga dapat dilihat bahwa partikel yang bergerak bersifat kontinu, selalu ada pada setiap tempat, tidak hilang pada titik tertentu.



Gambar 4.3 Penyederhanaan simulasi gerak proton



Gambar 4.4 Perbesaran simulasi gerak proton



Gambar 4.5 Rapat kebolehhjadian menemukan proton

Gambar 4.4 merupakan perbesaran dari setiap lintasan proton pada gambar 4.3. Terlihat keacakan gerakan partikel dengan keharmonikannya sesuai dengan pengertian gerak brown proton di dalam molekul  $H_2O$ . Gambar 4.4 tersebut menggambarkan gerak vibrasi proton dalam setiap lintasan  $l$ , jadi selain bergerak vibrasional proton juga bergerak rotasional dalam lintasan kisi. Dalam dinamika molekul terdapat beberapa tingkat energi, misalnya energi vibrasional dan energi rotasional. Pola yang ditunjukkan oleh gambar 4.4 merupakan pola simpangan akibat dari vibrasi dan rotasi molekul. Hal ini terbukti dalam spektrum molekul yang didapat dari spektroskopi. Pada gambar 4.5 ditunjukkan suatu grafik untuk  $|\psi|^2$ , karena  $|\psi|^2$  berbanding lurus secara langsung dengan peluang  $P$  untuk mendapatkan benda yang digambarkan oleh  $\psi$ , maka rapat kebolehhjadian menemukan partikel (proton) ditunjukkan dengan memplotkan  $|\psi|^2$  kedalam grafik. Peluang terbesar menemukan proton adalah pada nilai tertinggi dari  $|\psi|^2$  yaitu pada tengah-tengah sepanjang lintasan  $l$

Ini dapat dijelaskan dari gambar 4.1, proton bergerak pada jarak yang relatif dekat pusat massa pada inti sehingga kebolehhjadian menemukan proton terdapat pada tengah-tengah sepanjang lintasan  $l$ . Berbagai perhitungan dengan menggunakan massa tereduksi elektron, proton dapat dianggap diam sama sekali, itu berarti peluang untuk mendapatkan proton sangat besar pada tengah-tengah sepanjang lintasan  $l$ .

Setiap molekul memancarkan dan menyerap energi dengan vibrasi dan rotasi molekul. Kedua keadaan ini dipengaruhi oleh nilai bilangan kuantum dari masing-masing tingkat energi molekul.

### Kesimpulan

Dari penelitian yang telah dilakukan, dapat diambil beberapa kesimpulan:

1. Adanya gerak Brown pada partikel mikroskopik.
2. Proton berada pada dekat sumbu putar massa dalam sistem pergerakan proton dan elektron sehingga kebolehhjadian terbesar menemukan proton terletak pada tengah lintasan kisi.

### Daftar pustaka

- [1]. Krane, K. 1992. *Introductory to Nuclear Physics*. John Willey and Sons, Inc. New York.
- [2]. Ayres, F.Jr . 1992. *Persamaan Differensial* dalam satuan SI metric (terjemahan tim Erlangga). Penerbit Erlangga . Jakarta.
- [3]. Krane, K.1992. *Fisika Modern* (terjemahan Hans J.Wosparik). Penerbit Universitas Indonesia Press. Jakarta.
- [4]. Cornell dan Wieman. 1995. *Bose-Einstein Condensation*. Boulder.
- [5]. Nylund, E. 1993. *Proton Dynamics In Hydrogen-Bonded System*. Journal of Statistical Physics. Vol 70. Hal 163.

- [6]. Alkins, P.W. 1983. *Molecular Quantum Mechanics*. Edisi 2. Oxford University Press.
- [7]. Beisser, A. 1992. *Konsep Fisika Modern* (terjemahan The Houw Liong). Penerbit Erlangga. Jakarta.
- [8]. Dogra, S. 1978. *Kimia Fisik*. Penerbit Universitas Indonesia Press. Jakarta.
- [9]. Krane, K. 1992. *Introductory to Nuclear Physics*. John Wiley and Sons, Inc. New York.
- [10]. Zolotaryuk A.V. 1998. *Dichotomous Collective Proton Dynamics in Ice*. Physical Review B.57. 1.
- [11]. Alkins, P.W. 1983. *Molecular Quantum Mechanics*. Edisi 2. Oxford University Press.
- [12]. Gerald. 1978. *Applied Numerical Analysis*. London: Edison-Willey and Publishing Company.
- [13]. Liboff, L.R. 1989. *Quantum Mechanics*. Cornell University. USA.
- [14]. Gultom, B. dan Albert, S. 1989. *Solusi persamaan Diferensial Parsial Tak Linier dengan Kasus Distribusi Suhu Pada Pengerasan Logam Campuran*. Yogyakarta: proseding Simposium Fisika Nasional XII Himpunan Fisika Indonesia.
- [15]. Grössing, G. 2000. *Derivation the Schrödinger Equation and the Klein-Gordon Equation from First Principle*. Austrian Institute for Nonlinear Studies. Vienna. Austria.
- [16]. Gultom, B. dan Albert, S. 1989. *Solusi persamaan Diferensial Parsial Tak Linier dengan Kasus Distribusi Suhu Pada Pengerasan Logam Campuran*. Yogyakarta: proseding Simposium Fisika Nasional XII Himpunan Fisika Indonesia.
- [17]. Halliday, D. dan Resnick, R. 1990. *Fisika Modern* (terjemahan Pantur Silaban dan Erwin Sucipto). Edisi 3. Penerbit Erlangga. Jakarta.
- [18]. Hanselman dan Duane. 2000. *MATLAB Bahasa Komputasi Teknis* (terjemahan tim penerbit Andi). Penerbit Andi. Yogyakarta.
- [19]. Harker, C.J. 2002. *Numerically Solving the Klein-Gordon Equation*. Senior Thesis of Marlboro College. USA.
- [20]. Hofstadter, R. 1954. *Nukleon Structure*. Stanford University Press. California.
- [21]. Johnsen H. R. dan Grunwald. 1960. *Atoms, molecules and chemical change*. Edisi 2. Prentice-Hall, Inc. London.
- [22]. Krane, K. 1992. *Fisika Modern* (terjemahan Hans J. Wosparik). Penerbit Universitas Indonesia Press. Jakarta.
- [23]. Liboff, L.R. 1989. *Quantum Mechanics*. Cornell University. USA.
- [24]. Nylund, E. 1993. *Proton Dynamics In Hydrogen-Bonded System*. Journal of Statistical Physics. Vol 70. Hal 163.
- [25]. Peleg dan Yoav. 1998. *Quantum Mechanics*. Schaum's Outline Series, McGraw-Hill. London.
- [26]. Spiegel, M.R. 1992. *Matematika Lanjutan* edisi SI metrik (terjemahan tim Erlangga). Penerbit Erlangga. Jakarta.
- [27]. Zolotaryuk A.V. 1998. *Dichotomous Collective Proton Dynamics in Ice*. Physical Review B. 57. 1

